非調和格子系に於ける変調と減衰

鹿大理　井 上 政 義

（10月11日受理）

§1 序 論

物理現象は一般に階層構造を成しており，それ故に我々が現象を解明する場合には，いかなる物理量をどんな時間々隔で，どの様な観点に立って調べるのかという事が問題となる。また，それぞれの階層にはそれぞれ特有な法則があり，この異なる階層間の法則を関連づける事は物理学の大きな課題である。特に系の微視的な構造と法則を前提とし，これより系の巨視的性質を導く理論が統計力学である。微視的な法則としてはアトムの力学が最も本質的であるから，これより熱力学を合理的に基礎づけようとする仕事は古くから行なわれてきた。（尤もアイジングモデルの様に特別な法則を前提とするモデルも，しばしば統計力学の対象となる。）Gibbs の統計力学は系が“エルゴート性”を満していれば適用する事ができる。それならば系が如何なる条件を満たせばエルゴート性を持ち得るかという基礎的かつ困難な問題は統計力学の華々しい応用に較べて物理の問題として余り研究されていない。

数学的なエルゴート理論は von Neumann や Birkhoff 等によって論じられてきたが，物理的内容は乏しい。

さてまず問題の本質を探る為に簡単な系について調べる必要があるだろう。例えば調和格子系は良く知られている様に完全な規準座標が存在し，系はエルゴート性を持たない，それでは非調和項を加えればモード間にエネルギーのやり取りが起りエルゴート性を持つのではないかという考えが浮んでくる。しかし，非線型力学の解法は一般に困難であるから，Fermi 等[1]は粒子数の少ない場合につき computer simulation を行なった。この種の computer simulation は最近，Saitô 等[2]によって系統的に行なわれている。これらの結果から，非調和項の大きさや，固有振動数の間の関係がある条件を満せば，モード間のエネルギー交流が生じる事などが分かってきた，詳しい事は第2章に述べてある。我々はこの非調和格子系を，力学法則に基礎を置き厳密に展開さ

れた理論体系である Mori[3)]の多体系運動論を用いて調べる事にしよう。この理論に従えば力学量 A(t) の運動方程式は厳密に次の様に表わされる。

$$\frac{d}{dt}A(t) = iLA(t) \tag{1-1}$$

$$= -i\omega_0 A(t) - \int_0^t \lambda_0(s)\,A(s-t)\,ds + f(t),$$

where

$$\lambda_0(s) = (f_1(s),\ f_1^{*})/(A,\ A^{*}), \tag{1-2}$$

$$i\omega_0 = (\dot{A}(t),\ A^{*})/(A,\ A^{*}), \tag{1-3}$$

$$i_1(t) = \exp\left[t(1-\mathscr{P})\,iL\right] f_1(0), \tag{1-4}$$

$$f_1(0) \equiv \dot{A} - i\omega A. \tag{1-5}$$

ここで $\mathscr{P}$ は初期Aへの射影演算子であり，(　) は内積である。
また，相関々数に対して次の様な連分数展開を行なう事ができる。

$$\Xi(z) \equiv \int_0^\infty e^{-zt}dt\,(A(t),\ A^{*})/(A,\ A^{*}) \tag{1-6}$$

$$= \cfrac{1}{z - i\omega_0 + \cfrac{\Delta_1^2}{z - i\omega_1 + \cdots + \cfrac{\Delta_{n-1}^2}{z - i\omega_{n-1} + \Delta_n^2\lambda_{n-1}(z)}}} \tag{1-7}$$

where

$$i\omega_n = \frac{(\dot{f}_n,\ f_n^{*})}{(f_n,\ f_n^{*})} \tag{1-8}$$

$$\Delta_n^2 = \frac{(f_n,\ f_n^{*})}{(f_{n-1},\ f_{n-1}^{*})} \tag{1-9}$$

$$f_n = \left[1 - \sum_{\ell=0}^{n-1}\mathscr{P}_\ell\right] iL\, f_{n-1} \tag{1-10}$$

$$\dot{f}_n = \left[1 - \sum_{\ell=0}^{n-1} \mathcal{P}_\ell\right] iL\, f_n \qquad (1\text{-}11)$$

$$\lambda_{n-1}(z) = \int_0^\infty e^{-zt} dt\,(f_n(t),\, f_n^*)/(f_{n-1},\, f_{n-1}^*) \qquad (1\text{-}12)$$

ここで $\mathcal{P}_\ell$ は f_ℓ に射影する演算子である。

我々は古典力学系を取扱うので内積（　）は＜　＞で表わす事にしよう。さて内積であるが，統計力学の場合にはアンサンブル平均を取れば良い，しかし我々の場合は純粋に孤立力学系であるから，温度とか化学ポテンシャルという概念が存在しないので，アンサンブル平均を取る訳にはいかない。それでは時間平均ではどうかといえば（1-6）式から直ちに分る様に，時間平均を取ってしまえば（$A(t), A^*$）自身の時間依存性がなくなり，これを時間積分する意味がなくなってしまう。そこで我々は内積＜　＞を普通の関数の内積と定義する。例えば，a_j は振巾，ω_j は固有振動数，θ_j は位相をそれぞれ表わすとして，A_1，A_2 が次の様な運動，

$$A_1(t) = a_1 e^{i(\omega_1 t + \theta_1)}, \qquad (1\text{-}13)$$

$$A_2(t) = a_2 e^{i(\omega_2 t + \theta_2)}, \qquad (1\text{-}14)$$

をしている場合に内積 $\langle A_1(t)\ A_2^* \rangle$ は次の様に計算するものとしよう，

$$\langle A_1(t)\ A_2^* \rangle = \langle a_1 a_2 e^{i\{\omega_1 t + (\theta_1 - \theta_2)\}} \rangle,$$

$$\equiv a_1 a_2 \cos\{\omega_1 t + (\theta_1 - \theta_2)\}. \qquad (1\text{-}15)$$

これから分る様に，我々は力学系を扱っているから，どの時刻で内積を取ったかによって，内積の値は異なる事となる。また，多体の内積についても（1-15）式と同様の計算を行なう事にする。

§2　Computer simulation の諸結果

非調和格子系がはたしてエルゴート性を持っているや否やという疑問から Fermi 等[1)] は一次元非調和格子の一番小さい振動数のモードにのみ初めにエ

ネルギーを与え，このエネルギーが他のモードにどの様に流れていくかを computer を用いて調べた。これがこの種の computer simulation の始まりである。Fermi 等[1] は予想に反して再帰現象を発見し，系がエルゴート性を持つ為の条件を見出す事はできなかった。その後 Ford，Wateres[4] は次の重要な結果を得た。即ち，固有振動数を ω_k，三次の結合パラメータを α とし，n_k をある整数とすれば共鳴条件，

$$\sum_k n_k \omega_k \lesssim \alpha \qquad (2\text{-}1)$$

を満足すれば，$n_k = 0$ でないモード $\{\omega_k\}$ の間でエネルギーのやり取りが行なわれる事を示した。Fermi 等[1] の実験で振動数の高いモードへエネルギーが流れなかった原因の一つはこの共鳴条件を系が満していなかったからである。最近，Saitô 等[2] はこの種の computer simulation を多面的に行なっている。特に Saitô，Hirooka[2] による二次元四次非調和正方格子（粒子数は 3×3 個と 5×5 個）につき詳しく調べた。以下，彼らの得た主要な結果を列記してみよう。

〔I〕 誘導期間

あるモードにエネルギーを与えると，まず“誘導期間”が存在し，この期間を経過して後，このエネルギーが他のモードに流れ，系は平衡状態へと接近していく。

〔II〕 臨界値の存在

この誘導期間は，結合パラメータ α の値が小さくなれば長くなり，ある臨界値 α_0 よりも小さければ無限大になると予想される。

〔III〕 誘い水の効果

エネルギー分配は，高い振動数のモードを励起した方が起りやすく，また，予め他のモードにもエネルギーを少しでも与えておくと，さらに分配が速い。

〔IV〕 粒子数の効果

臨界値 α_0 は系の粒子数が増せば小さくなる。

§3　調和格子系

複雑な非調和格子系を調べる前に，系の性質が良く知られている簡単な例につきこの章と次章にて，我々の方法を適用してみよう。特に当章で扱う調和格子系は，以下に調べる非調和格子系の基本となるものである。

調和格子系の Hamiltonian は次のとおりである。

$$H = \frac{1}{2}\sum_i (p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2), \qquad (3\text{-}1)$$

ここに，p_i，q_i はそれぞれ i 番目の粒子の規準運動量および規準座標であり，ω_i はこれに対応する固有振動数である。

さて，力学量 A として次の如く選ぶとしよう。

$$A = p_i + i\omega_i q_i \qquad (3\text{-}2)$$

この様に選べば，例えば $AA^* = p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2$ はモードのエネルギーを表わす。

まず Hamilton の運動方程式より，

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i},$$
$$= -\omega^2 q_i, \qquad (3\text{-}3)$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i},$$
$$= p_i, \qquad (3\text{-}4)$$

次に力学量 A の相関々数 $\Xi(z)$ を計算し A の運動を調べよう，式 (1-7) ～ (1-12) によれば，

$$\Xi(z) \equiv \int_0^\infty \epsilon^{-zt} dt \langle A(t)\, A^* \rangle / \langle A\, A^* \rangle,$$
$$= \frac{1}{z - i\omega_0 + \lambda_0(z)} \qquad (3\text{-}5)$$

where

$$i\,\omega_0 = \langle \dot{A}\, A^* \rangle / \langle A\, A^* \rangle \qquad (3\text{-}6)$$

$$\lambda_0(z) = \int_0^\infty e^{-zt} dt < f_1(t)\ f_1^* > / < A\ A^* > \tag{3-7}$$

$$f_1 = \dot{A} - i\omega_0\ A \tag{3-8}$$

上に表われた振動数 ω_0 は $\dot{A}$ を式（3-3）および（3-4）から求めた値を用いれば簡単に計算できる，即ち，

$$\begin{aligned} i\,\omega_0 &= \frac{i\,\omega_i\,\{<p_i^2> + \omega_i^2 <q_i^2>\}}{<p_i^2> + \omega_i^2 <q_i^2>}\ , \\ &= i\,\omega_i \end{aligned} \tag{3-9}$$

これから分る様に振動数 ω_0 は ω_i と全く同じである。

いま得られた（3-9）式を（3-8）式に代入すれば，

$$\begin{aligned} f_1 &= -\,\omega_i^2 q_i + i\,\omega_i\, p_i - i\,\omega_i\,(\,p_i + i\omega_i\, q_i\,)\ , \\ &= 0 \end{aligned} \tag{3-10}$$

すなわち，調和格子系では A に random force は働かない事がわかる。

これより直ちに，

$$\lambda_0(z) = 0 \tag{3-11}$$

以上の二つの結果（3-9），（3-11）式を（3-5）式に代入すれば $\Xi(z)$ は，

$$\Xi(z) = \frac{1}{z - i\,\omega_i}\ , \tag{3-12}$$

と求まり，この $\Xi(z)$ の pole は，

$$z = i\,\omega_i\ , \tag{3-13}$$

となる。次に時間表示になおしAの運動を具体的に書けば結局，次の様に求まる，

$$A(t) = A_0\, e^{i\,\omega_i t} \tag{3-14}$$

§4　一次元一粒子四次非調和格子

この章では非調和格子系のなかでも最も単純であり，厳密解も知られている

一次元一粒子四次非調和格子を我々の方法で調べてみよう。この格子のHamiltonianは次ぎのとおりである，

$$H = \frac{1}{2} p^2 + \frac{\omega^2}{2} q^2 + \frac{\gamma}{4} q^4 , \qquad (4\text{-}1)$$

ここで γ は四次非調和項のパラメータである。

我々が調べる力学量として運動量を選ぶとしよう，即ち，

$$A = p . \qquad (4\text{-}2)$$

Hamilton の運動方程式より，

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

$$= -\omega^2 q - \gamma q^3 \qquad (4\text{-}3)$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

$$= p \qquad (4\text{-}4)$$

を得る。

さてAについての相関々数 $\Xi(z)$ の計算であるが，まず $\Xi(z)$ に対して，二回連分数展開を行なう事とし，この場合に $A = A^*$ である事に注意すれば，(1-6) ～ (1-12) 式より，

$$\Xi(z) \equiv \int_0^\infty e^{-zt} dt < A(t), A > / < A A > .$$

$$= \cfrac{1}{z + \cfrac{\Delta_1^2}{z + \lambda_1(z)}} \qquad (4\text{-}5)$$

where

$$\Delta_1^2 = < \dot{A} \dot{A} > / < A A > \qquad (4\text{-}6)$$

$$\lambda_1(z) = \int_0^\infty e^{-zt} dt < f_2(t), f_2 > / < f_1 f_1 > \qquad (4\text{-}7)$$

$$f_1 = \dot{A} \qquad (4\text{-}8)$$

$$f_2 = \ddot{A} + \Delta_1^2 A \qquad (4\text{-}9)$$

ここに表われた Δ_1^2 は，次の関係式，

$$\langle \dot{A}\,\dot{A} \rangle = - \langle \ddot{A}\,A \rangle \tag{4-10}$$

を用いれば，（4-2）～（4-4）式と（4-6）式より次の様に求まる，

$$\Delta_1^2 = \omega^2 + 3\gamma \frac{\langle p^2 q^2 \rangle}{\langle p^2 \rangle} \tag{4-11}$$

次に f_2 を求めよう，f_2 はいま得られた（4-11）式を（4-9）式に代入すれば得られる。即ち，

$$f_2 = 3\gamma p \left\{ \frac{\langle p^2 q^2 \rangle}{\langle p^2 \rangle} - q^2 \right\} \tag{4-12}$$

さて，当章の目的は単純な例題に我々の方法を適用し，我々の方法の性格を知る事が課題であるから，近似を推めて複雑な計算をする事は避けよう。そこで λ_1 の γ 依存性を探ってみると，式（4-13）より $f_2 \propto \gamma$，また f_1 は式（4-3），（4-8）から分る様に γ の掛らない項がある，これらより，

$$\lambda \propto \gamma^2 \tag{4-13}$$

となるから，この λ_1 を無視する事にしよう。そうすると $\Xi(z)$ の pole は（4-5）式から分る様に，Δ_1^2 のみで決定される事になる。ところで Δ_1^2 は（4-11）式で与えられているが，ここで問題となるのは，$\langle p^2 q^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ の値である。これを厳密に求める事は困難であるから調和格子系の場合に成立する次の関係式，

$$\langle q'^2 \rangle = \frac{1}{2} a'^2 (1 - \cos 2\theta') \tag{4-14}$$

$$\langle p'^2 q'^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle p'^2 \rangle \langle q'^2 \rangle \tag{4-15}$$

where，q′，p′，a′ は調和格子系の座標，運動量および振巾をそれぞれ表し，θ' は内積を取った時刻での位相を表す。

を我々の場合に準用すれば，

$$\langle q^2 \rangle \cong \frac{1}{2} a^2 (1 - \cos 2\theta) \tag{4-16}$$

$$\langle p^2 q^2 \rangle \cong \frac{1}{2} \langle p^2 \rangle \langle q^2 \rangle \tag{4-17}$$

where，aは振巾を，θは位相を表わす。

なる多体相関の分解公式および相関の値を得る，この公式はγが小さい時に良く成立するであろう。そうすると結局，$\Xi(z)$のpoleは（4-5），（4-11），（4-15）式より次の様に求まる。

$$z \cong \pm i\sqrt{\omega^2 + 3\gamma\frac{\langle p^2 q^2\rangle}{\langle p^2\rangle}}$$

$$\cong \pm i\omega\left\{1 + \frac{3}{8}\cdot\frac{\gamma a^2}{\omega^2}(1-\cos 2\theta)\right\} \qquad (4\text{–}18)$$

ここに求められた解（4-18）式は，非線型振動論の摂動近似法で得られる解と同じである。また，この単純な問題の場合には厳密解が楕円関数によって表わされ，解（4-18）式は良い近似である事が知られている。ところで一般に物理的意味のある側面は近似解の方が捉え易い場合がある。そこで解（4-18）式の意味を考えてみよう。

（1） $\gamma \to 0$となれば系は調和格子系に移行する。

（2） 非調和格子の場合には振動数に固有振動数からのshift $\Delta\omega$が起り，これは，

$$\Delta\omega \propto \frac{\gamma a^2}{\omega^2}(1-\cos 2\theta) \qquad (4\text{-}17)$$

である。特に$\Delta\omega$が初期条件a^2と，内積を取った時刻のθに依存する事は重視すべき現象である。また次の事に注意しよう。即ち，位相θ自身は又$2\pi/\omega$の周期で時間と共に変化しているからこの事より$\Delta\omega(t)$を求める事ができる。簡単の為，$t=0$での位相を零に取れば，

$$\Delta\omega(t) = \frac{3}{8}\frac{\gamma a^2}{\omega^2}(1-\cos 2\omega t) \qquad (4\text{-}18)$$

すなわち，$\Delta\omega$自身がω/πの周期で変化しているのである。式（4-18）より$\Delta\omega$の時間平均$\overline{\Delta\omega}$は，

$$\overline{\Delta\omega} = \frac{3}{8}\frac{\gamma a^2}{\omega^2} \qquad (4\text{-}19)$$

と求まる。

以上，我々は固有振動数の shift を求めたが，もっともこの様な捉え方は系の運動の基本を飽くまでも調和格子系に取り，非調和項の効果をその基本からの shift として理解する見方に立っての話である。

§5　Ford の格子系

Ford と Waters[4)] が computer simulation を遂行し，いわゆる共鳴条件を見出した，一次元二粒子三次非調和格子系の解析を試みよう。単純な系ではあるが，一般の非調和格子系が示す本質的性質の殆んどを，この単純な系より探る事ができると思う。この系の Hamiltonian は次のとおりである。

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + \omega_1^2 q_1^2 + \omega_2^2 q_2^2) + \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(q_1^2 q_2 - q_2^3) \tag{5-1}$$

ここで α は三次の結合パラメータである。

我々が調べる力学量 A として，

$$A = p_1 + i\omega_1 q_1 \tag{5-2}$$

と選ぶ事にしよう。

Hamiltonian (5-1) 式より次の関係式を得る。

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} = p_j \ ; \quad j = 1, 2, \tag{5-3}$$

$$\dot{p}_1 = -\frac{\partial H}{\partial q_1} = -\omega_1^2 q_1 - \frac{2\alpha}{\sqrt{2}} q_1 q_2 \tag{5-4}$$

$$\dot{p}_2 = -\frac{\partial H}{\partial q_2} = -\omega_2^2 q_2 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(q_1^2 - 3q_2^2) \tag{5-5}$$

さてAの相関々数 $\Xi(z)$ を一回連分数展開してみれば式（1-6）～（1-12）より，

$$\Xi(z) \equiv \int_0^\infty e^{-zt} dt \langle A(t)\, A^* \rangle / \langle A A^* \rangle \tag{5-6}$$

$$= \frac{1}{z - i\omega_0 + \lambda_0(z)} \tag{5-7}$$

where

$$i\omega_0 = \langle \dot{A}\, A^* \rangle / \langle A A^* \rangle \tag{5-8}$$

$$\lambda_0(z) = \int_0^\infty e^{-zt} dt \langle f_1(t)\, f_1^* \rangle / \langle A A^* \rangle \tag{5-9}$$

$$f_1 = \dot{A} - i\omega_0 A \tag{5-10}$$

$$f_1(t) = \exp\{t(1-\mathscr{P})\, iL\}\, f_1 \tag{5-11}$$

最初に $i\omega_0$ を計算してみよう。これは $\dot{A}$ を式（5-3），（5-4）を用いて求め，この結果を（5-8）式に代入すれば，次の様に求まる。

$$i\omega_0 = i\omega_1 + \frac{2\alpha}{\sqrt{2}} \frac{i\omega_1 \langle q_1^2 q_2 \rangle - \langle q_1 q_2 p_1 \rangle}{\langle p_1^2 \rangle + \omega_1^2 \langle q_1^2 \rangle} \tag{5-12}$$

さて，ここに表われた，$\langle q_1^2 q_2 \rangle$，$\langle q_1 q_2 p_1 \rangle$，$\{\langle p_1^2 \rangle + \omega_1^2 \langle q_1^2 \rangle\}$ の値を前章と同様の近似方法を用い具体的に求めよう。我々は結合パラメータ α が小さい場合を考えているから，q_1，q_2，p_1 に対して，

$$q_1(t) \cong a_1 \sin(\omega_1 t + \theta_1) \tag{5-13}$$

$$q_2(t) \cong a_2 \sin(\omega_2 t + \theta_2) \tag{5-14}$$

$$p_1(t) \cong \omega_1 a_1 \cos(\omega_1 t + \theta_1) \tag{5-15}$$

と近似できるであろう。ここで a_j，θ_j は初期条件より決定される，振巾および位相をそれぞれ表わしている。この近似（5-13）～（5-15）式を用いれば，

$$\langle q_1^2 q_2 \rangle \cong 0 \tag{5-16}$$

$$\langle q_1 q_2 p_1 \rangle \simeq \frac{1}{2}\,\omega_1 a_1{}^2 a_2 \sin 2\theta_1 \sin\theta_2 \tag{5-17}$$

$$\begin{aligned}\langle p_1{}^2\rangle + \omega_1{}^2\langle q_1{}^2\rangle &= \langle A A^*\rangle \\ &\cong \omega_1{}^2 a_1{}^2\end{aligned} \tag{5-18}$$

これら（5-16）～（5-18）式の値を（5-12）に代入しよう。その時，前章と同様に，時々刻々と進む時間の各時刻をそれぞれ初期時刻と見立てれば，位相は時間に変換できる事に注意しよう。また簡単の為 $t=0$ で $\theta_1=\theta_2=0$ とすれば，

$$i\omega_0(t) \cong i\omega_1 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\cdot\frac{a_2}{\omega_1}\sin 2\omega_1 t \sin\omega_2 t \tag{5-19}$$

or

$$\cong i\omega_1 + \frac{\alpha}{2\sqrt{2}}\cdot\frac{a_2}{\omega_1}\left\{\cos(2\omega_1+\omega_2)t - \cos(2\omega_1-\omega_2)t\right\} \tag{5-20}$$

ところで，λ_0 は次に示す様に α^2 に比例するから，これを無視すると，$\Xi(z)$ の pole z_1 は（5-7），（5-20）より，

$$z_1 = i\omega_0(t) \tag{5-21}$$

この（5-21）式と（5-20）式より次の事が分る。即ち Ford 格子には非調和項として三次の項しかないので，α の一次の範囲内では frequency shift が起らず，その代りに damping $\gamma_1(t)=\mathcal{R}e\, z_1$ が現われる。これは次のとおりである。

$$\gamma_1(t) = \frac{\alpha}{2\sqrt{2}}\cdot\frac{a_2}{\omega_1}\left\{\cos(2\omega_1+\omega_2)t - \cos(2\omega_1-\omega_2)t\right\} \tag{5-22}$$

この結果を前章の四次非調和格子の場合と比較してみると，四次の場合は，α の一次の範囲内で frequency shift が生じた。これは統計力学で知られている，三次からは damping が生じ，四次からは frequency shift が生じるという事と一致している。尤も我々の damping $\gamma_1(t)$ は周期的に正，負の値を取りその時間平均 $\overline{\gamma_1(t)}$ は，（5-22）式より，

$$\overline{\gamma_1(t)} = 0 \;;\quad 2\omega_1 \pm \omega_2 \neq 0 \tag{5-23}$$

となる。即ち，力学系のあるモードは，減衰と生長を周期的に繰り返し，その長時間平均は零となる。この事は孤立力学系に於いては本当の damping がないという事と一致している。ただ，系が共鳴条件；$2\omega_1 \pm \omega_2 \cong 0$ を満している場合は，(5-22) 式から分る様に damping $\gamma_1(t)$ の周期：$2\pi/2\omega_1 \pm \omega_2$ は極めて長くなり，我々がこの周期より短い時間々隔で観測するならば，力学系でありながら，恰も本当の減衰あるいは生長が起っているかの如くに見える。但し解 (5-22) 式の場合は，異なる周期をもつ二つの項の差という形を取っているので事情はやや複雑である。また注目すべき事は，解 (5-22) 式から分る様に $\gamma_1 \propto a_2$ となっている。a_2 は相手のモードの振巾であるからして，相手のモードが励起しているほどエネルギーの交流が激しく，また，励起していなければ，交流が起り難い事を示している。この事で第2章に述べた“誘い水の効果”は説明がついたと思う。またこれから考えると，“誘導期間”とは，エネルギー交流が充分に起るに必要なだけの振巾を相手のモードが獲得するまでの準備期間だと解される，この様に解釈してみれば“誘導期間”なるものは，初期条件ですでにエネルギーを与えて置けば短かくなる如く，系を特徴づける本質的な概念ではないと思われる。また解 (5-22) 式は $\gamma_1 \propto 1/\omega_1$ となっている。即ち，自分の振動数が小さいほどエネルギーの出入りが激しい訳である。これは，振動数が小さい事はつまりモードが軟らかい事であるから当然の結果といえる。

次に近似を推めて，α^2 の項つまり $\lambda_0(z)$ も計算する事にしよう。式 (5-7) から分る様に λ_0 が小さい場合に，$\Xi(z)$ に対して次の近似ができる。[3)]

$$\Xi(z) \cong \frac{1}{z - i\omega_0 + \lambda_0(i\omega_0)} \qquad (5\text{-}24)$$

上式右辺の pole z_2 を次の様に表わす。

$$z_2 = \gamma_2 + i\omega_1' \qquad (5\text{-}25)$$

where

$$\begin{aligned} \gamma_2 &\equiv \mathcal{R}e\left[i\omega_0 - \lambda_0(i\omega_0) \right] \\ &= \gamma_1 - \mathcal{R}e\, \lambda_0(i\omega_0) \qquad (5\text{-}26) \end{aligned}$$

$$\omega_1 \equiv \mathscr{I}_m \left[i\omega_0 - \lambda_0(i\omega_0) \right]$$
$$= i\omega_1 - \mathscr{I} \ \lambda_0(i\omega_0) \qquad (5\text{-}27)$$

ここに導入した、r_2 および ω_1' はそれぞれ α の第二次まで考慮した constant および新しい固有振動数を意味している。

まず f_1 であるが，f_1 は $\exp\{t(1-\mathscr{P})iL\}$ によって時間発展をする，ところでここの $\mathscr{P}$ を無視すれば f_1 は普通の時間発展（$\exp\{tiL\}$）をするから，(5-2)，(5-3)，(5-4) 式と (5-10)，(5-19) 式より，

$$f_1(t) \cong \frac{2}{\sqrt{2}}\alpha\left[\frac{a_2}{2\omega_1}\sin 2(\omega_1 t+\theta_1)\sin(\omega_2 t+\theta_2)A_0 e^{i(\omega_1 t+\theta_1)}\right.$$
$$\left. - a_1 a_2 \sin(\omega_1 t+\theta_1)\sin(\omega_2 t+\theta_2)\right] \qquad (5\text{-}28)$$

$$\text{where} \quad A(t) \cong A_0 e^{i(\omega_1 t+\theta_1)} \qquad (5\text{-}29)$$

$$A_0 \cong a_1\omega_1 \qquad (5\text{-}30)$$

但しここで，q_1，q_2 に対して (5-13)，(5-14) の近似式を用い，また $t=0$ での位相を振動 ω_1 については θ_1，また振動 ω_2 については θ_2 としてある。近似表示 (5-29)，(5-30) は，近似表示 (5-13)，(5-14) から直ちに求まる。さてこの $\mathscr{P}$ を無視する近似は τ_c を random force f_1 の相関時間だとすれば，z が次の条件を満せば良い近似となる。[3)]

$$\frac{1}{\tau_c} \gg |z| \gg r_2,\ |\omega_1'| \qquad (5\text{-}31)$$

式 (5-28) で与えられた，$f_1(t)$ を (5-9) 式の左辺に代入し，内積を取り，$z=i\omega_0$ で Laplace 変換を行ない，また (5-18)，(5-30) 式の値を用いれば $\lambda_0(i\omega_0)$ は結局，次の様に求まる。

$$\lambda_0(i\omega_0) \cong \frac{1}{64}\frac{a_2^{\,2}}{\omega_1^{\,2}}\cdot\alpha$$
$$\times\left[\left\{\frac{1}{2\omega_1+\omega_2}(g_1(\omega_1,\omega_2)+g_2(\omega_1,\omega_2))\right.\right.$$

$$+\frac{1}{2\omega_1-\omega_2}(g_1(\omega_1,-\omega_2)+g_2(\omega_1,-\omega_2))$$

$$+\frac{1}{4\omega_1+\omega_2}g_1(\omega_1,\omega_2)+\frac{1}{4\omega_1-\omega_2}g_1(\omega_1,-\omega_2)$$

$$+\frac{1}{\omega_2}(g_2(\omega_1,\omega_2)-g_2(\omega_1,-\omega_2))\}$$

$$+\ i\ \{\frac{1}{2\omega_1+\omega_2}(g_3(\omega_1,\omega_2)+g_4(\omega_1,\omega_2))$$

$$+\frac{1}{2\omega_1-\omega_2}(g_3(\omega_1,-\omega_2)+g_4(\omega_1,-\omega_2))$$

$$-\frac{1}{4\omega_1+\omega_2}g_3(\omega_1,\omega_2)-\frac{1}{4\omega_1-\omega_2}g_3(\omega_1,-\omega_2)$$

$$-\frac{1}{\omega_2}(g_4(\omega_1,\omega_2)-g_4(\omega_1,-\omega_2))\}] \qquad (5\text{-}32)$$

但し

$$;\ 2\omega_1\pm\omega_2\neq 0,\ \ 4\omega_1\pm\omega_2\neq 0,\ \ \omega_2\neq 0, \qquad (5\text{-}33)$$

where

$$g_1(\omega_1,\omega_2)\equiv\{\sin 2(2\omega_1+\omega_2)t-2\sin 2(\omega_1+\omega_2)t$$
$$-\sin 4\omega_1 t+2\sin 2\omega_2 t+\sin 2\omega_2 t\} \qquad (5\text{-}33)$$

$$g_2(\omega_1,\omega_2)\equiv\{\sin 2(2\omega_1+\omega_2)t-4\sin 2(\omega_1+\omega_2)t$$
$$+2\sin 2(\omega_1-\omega_2)t-4\sin 4\omega_1 t$$
$$+2\sin 2\omega_1 t+5\sin 2\omega_2 t\} \qquad (5\text{-}34)$$

$$g_3(\omega_1,\omega_2)\equiv 1-g_1'(\omega_1,\omega_2) \qquad (5\text{-}35)$$

$$g_4(\omega_1,\omega_2)\equiv -5+g_2'(\omega_1,\omega_2) \qquad (5\text{-}36)$$

$g_1'(\omega_1,\omega_2)$; (5-33) 式右辺の sin を cos に替えた関数

$g_2'(\omega_1,\omega_2)$; (5-34) 式右辺の sin を cos に替えた関数

但し (5-32) 式を求める時，$z=i\omega_1$ として Laplace 変換をした，この事は (5-19) 式から分る様に $i\omega_0\cong i\omega_1$ である事から正当づけられる。ま

た，$t=\infty$ での値が不定になるのを避ける為に z に正の微小量 ε を加え，最後に $\varepsilon\to 0$ とした，この時デルタ関数が現われるが，我々の近似の範囲では余り意味がないので（5-33）式の条件を加えこれを除いた。一般に行なわれる様に $z=i\omega_0$ で計算すれば，我々の場合は $i\omega_0$ に実数部があるので位相によって，$\mathcal{R}e\, z<0$ となる時もある。この場合は解析接続をしなければいけない。しかし，我々の場合は，$z=i\omega_0$ で計算してもただ繁雑さを増すのみであるから，これを避け $z=i\omega_1$ の計算で近似した。また前と同様に位相を時間に変換した。

さて我々は，いま求めた，$\lambda_0(i\omega_0)$ を用いれば，r_2 および ω_1' の値を具体的に得る事が可能である。まず，r_2 の時間平均 $\overline{r_2}$ を求めてみると，（5-33），（5-34）式の g_1, g_2 が正弦関数しか含んでいないから，（5-23），（5-26），（5-32）式より直ちに，

$$\overline{r_2(t)} = 0 \tag{5-37}$$

この結果は我々の系が力学系であるから当然である。

次に興味あるものとして r_2 の中で，長周期でかつ大きな値を取り得る部分 $r_{2,\ell}$ を抜粋してみよう。これは（5-22），（5-26），（5-32），（5-33），（5-34）式より，

$$r_{2,\ell}(t) = r_1(t) \frac{1}{32}\left(\frac{a_1}{\omega_1}\alpha\right)^2\left\{\frac{1}{2\omega_1+\omega_2}\sin 2(2\omega_1+\omega_2)t + \frac{1}{2\omega_1-\omega_2}\sin 2(2\omega_1-\omega_2)t\right\} \tag{5-38}$$

上式から，共鳴条件 $2\omega_1\pm\omega_2\cong 0$ を良く満せば満すほど，減衰または生長が強く起り，かつその周期が長くなる事が分る。この事情は Ford 等[4]の computer simulation の結果と極めて良く一致している。また（5-38）式から，

$$\frac{1}{\omega_1},\ \frac{1}{\omega_2} \ll \frac{1}{2\omega_1\pm\omega_2} \tag{5-39}$$

の場合に Poincaré の再帰時間 T が次の様に評価できる，

$$T \sim \frac{\pi}{2\omega_1 \pm \omega_2} \tag{5-40}$$

もっとも，我々の解（5-38）式は近似解であるから，（$2\omega_1 \pm \omega_2$）が零に近づけば，条件（5-39）式は良く成立する様になるが，評価（5-40）式は疑がわしくなると思われる。なお短かい周期の damping は我々が短かい時間々隔の現象に注目しない限り，無視できる。

次に frequency shift の時間平均 $\overline{\Delta\omega_1}$ を求めよう，これは（5-27），（5-33），（5-35），（5-36）式より次の如く求まる。

$$\overline{\Delta\omega_1} = \frac{1}{64}\left(\frac{a_2}{\omega_1}\alpha\right)^2 \left[\frac{4}{2\omega_1+\omega_2} + \frac{4}{2\omega_1-\omega_2} + \frac{1}{4\omega_1+\omega_2} + \frac{1}{4\omega_1-\omega_2}\right] \tag{5-41}$$

上の結果から，frequency shift には damping constant と異なり，secular な部分がある事が分る。また，$\overline{\Delta\omega_1}$ も共鳴条件 $2\omega_1 \pm \omega_2$，$4\omega_1 \pm \omega_2 \cong 0$ を満せば大きくなると言える。注目すべき，もう一つの事柄は，四次非調和格子を扱った前章の場合と異なり，frequency shift が α の二乗の項から初めて表われた事である。

最後に摂動論と我々の方法を簡単に較べてみよう。摂動論では，

$$\left.\begin{aligned} &q_1 = A_1 \cos\tau_1 + \alpha q_{11} + \alpha^2 q_{12} \\ &\text{where} \\ &\qquad \tau_1 = \Omega_1\tau + \theta \end{aligned}\right\} \tag{5-42}$$

（但し，記号は普通のとおりである。）

という展開をし，q_{11}，q_{12}，……を求め，これを用い Ω_1 を求めるという scheme になっている。

我々の場合は，

$$q_1 = \mathscr{I}m\, A_1\, e^{i(\Omega+\theta)t} \cdot e^{\gamma t} \tag{5-43}$$

として，Ω と γ を求める scheme になっている，（5-43）式の $\exp(\gamma t)$

の項を展開してみれば分る様に，我々の方法は，（5-42）式右辺をまとめ上げた形を初めから取っている。この様に scheme が異なるので，得られた結果を直接に比較できないが，当章の問題に就いて言えば，例えば $\gamma_{2,\ell}(t)$ に対応するものが摂動論では求まっていない。一般に damping constant を求める事に関しては，我々の方法が優れていると思う。また，非調和格子系の場合は dampirg constant が最も興味深い物理量である。

§6 結 び

エルゴート性の研究に端を発した非調和格子系の問題を我々は Mori の多体系運動論を用いて調べた。我々は次の様に言えるだろう，平衡系統計力学に立つ限りエルゴート性を仮定せざるをえない。しかし力学に基礎を置いた運動論を用いて系の運動諸形態を調べるという立場に立てば，エルゴート性とは系の運動を特徴づける一つの性質にすぎないと言えるし，エルゴート性を平衡状態への達し易さとして捉えるならば，定量的な意味づけができるであろう（H－定理の立場と同じ）。また，我々が調べた例からも分る様に，系の運動（例えば長周期減衰）を規定するのは系のエレメントが従う力学法則よりも，寧ろ系の構造（例えば非調項が在るか否か），である。ボルツマンの統計力学ではエルゴート定理に対応するものとしてH定理がある。この定理の証明にあたって剛体ポテンシャルが果す役割を，非調和格子系の場合は非調和項（非線型ポテンシャル）が果している事に注意しよう。尤もボルツマンの場合は，力学と熱力学の狭間を埋めようとしながらも衝突数の仮定なる確率過程を用いざるをえなかった。このH定理にしろ，平衡接近のモデルである urn モデルにしろ、何故に確率的考察が許されるかが問題である。

また我々がここで用いた，Mori の多体系運動論を応用した方法は，非線型振動論の新しい解法を示している。これは従来の摂動論と scheme が異なり，特に damping を求めるのに適している。

なお，次元，個数，ポテンシャルの形による相違，また臨界値 α_0 の存在などは今後の問題であり，更に振巾 $\{a_i\}$ と damping constant $\{\gamma_i\}$ を consistent に扱う事も考える必要があろう。

文　献

1) E. Fermi, J. Pasta and S. Ulam: Los Alamos Scientific Laboratory Report LA–1940 (1955).

2) H. Hirooka and N. Saitô : J. Phys. Soc. Japan 26 (1969) 624.

3) H. Mori : Progr. theor. Phys. 33 (1965) 423;
ibid. 34 (1965) 399.
H. Mori : in Tokyo Summer Lectures in Theoretical Physics, ed. by R. Kubo (Syokabo and W. A. Benjamin, 1966) Part I, p. 17.

4) J. Ford and J. Waters : J. Math. Phys. 4 (1963) 1293.